**Молчанова, Марина Станиславовна.**
Компьютерная генерация структурных изомеров и ее практическое применение в органической химии : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.03. - Москва, 1997. - 149 с.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Молчанова, Марина Станиславовна

ВВЕДЕНИЕ

I. ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ, МЕТОДЫ И ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ СТРУКТУРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ

1.1. Перечислительные задачи для структурных формул органических соединений.

1.1.1. Проблема установления числа изомеров. Теоретико-графовое представление молекул.

1.1.2. Компьютерная генерация. .И

1.2. Характеристики существующих генераторов структур.

1.2.1. Учет размеров генерируемых молекул

1.2.2. Другие структурные ограничения.

1.2.3. "Метод сборки" и "метод редукции"

1.2.4. Способы исключения дубликатов.

1.2.5. Использование многоатомных фрагментов при генерации изомеров.

1.2.6. Особенности генерации ациклических структур.

1.2.7. Проблема водородных атомов.

1.2.8. Детерминистские и стохастические подходы.

1.3. Применение компьютерной генерации в химии.

1.3.1. Распознавание молекулярных структур.

L3.2. Предсказание соединений с требуемыми свойствами

I.3.3. Другие области применения генерации.

II. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

II. 1. Компьютерное представление структурных изомеров

11.2. Проблема каноничности

11.3. Обязательные, запрещенные и разрешенные фрагменты . 36 И.3.1. Способы задания фрагментов

II.3.2. Список обязательных подструктур.

11.3.3. Список запрещенных подструктур

11.3.4. Разрешенные подструктуры.

II.4. Валентности атомов.

И.5. Прочие характеристики молекул.

11.5.1. Типы локального окружения атомов и гибридизации

11.5.2. Характеризация циклической системы

11.5.3. Рассмотрение ароматичности

11.5.4. Учет топологии целевых структур

III. АЛГОРИТМ ГЕНЕРАЦИИ ИЗОМЕРОВ

III. 1. Конструирование из отдельных атомов.

III. 1.1. Основные принципы.

III. 1.2. Пример генерации.

III. 1.3. Слабая каноничность.

III. 1.4. Форсирование

III. 1.5. Проверка связности.

III. 1.6. Проверка сильной каноничности

111.2. Конструирование с использованием многоатомных фрагментов

111.2.1. Неперекрывающиеся подструктуры.

111.2.2. Перекрывающиеся подструктуры.

111.2.3. Группы.

111.3. Учет дополнительных структурных ограничений

111.3.1. Обязательные и запрещенные подструктуры

111.3.2. Разрешенные подструктуры.

111.3.3. Необычные валентные состояния атомов.

111.3.4. Локальные окружения атомов и типы гибридизации

111.3.5. Циклы

111.3.6. Обнаружение ароматических систем и поиск канонических резонансных структур

111.3.7. Учет топологической симметрии

111.3.8. Учет планарности.

111.4. Графическое представление молекул.

IV. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

IV. 1. Формальное перечисление изомеров и сравнение SMOG с другими генераторами.

IV.1.I. Генерация с использованием только брутто-формулы

IV. 1.2. Генерация с использованием базовых фрагментов.

IV.2. Установление структурных формул соединений.

IV.3.Теоретическое предсказание новых веществ с требуемыми свойствами.

IV.3.1. Поиск перспективных энергоемких соединений среди нитразапроизводных изомеров адамантана и вюрцитана

IV.3.2. Оценка потенциальной эффективности поиска новых высокоэнергетических веществ в зависимости от кислородного баланса.

IV.3.3. Поиск высокоплотных гетероароматических соединений

IV.4. Установление зависимостей "структура-свойство"

IV.4.1. Взаимосвязь между структурой каркасных углеводородов и их энергосодержанием.

IV.4.2. Взаимосвязь между структурой и физико-химическими свойствами нитро- и нитразапроизводных каркасных молекул.